

В сборнике представлены тезисы докладов XXI Международной конференции «Уравнения состояния вещества» (Эльбрус, 1–6 марта 2006). Доклады отражают современное состояние исследований в области физики экстремальных состояний вещества. Рассмотрены следующие вопросы: модели и теоретические расчеты уравнений состояния веществ в условиях высокой концентрации энергии; физика ударных и детонационных волн; экспериментальные методы диагностики быстрых процессов; методы генерации интенсивных импульсных потоков энергии; взаимодействие мощных ионных и электронных пучков, интенсивного лазерного, рентгеновского и СВЧ излучения с веществом; электрический взрыв проводников под действием мощных импульсов тока; физика низкотемпературной плазмы; различные физико-энергетические проблемы и технологии.

Конференция проводится при финансовой поддержке Российской академии наук и Российского фонда фундаментальных исследований.

Под редакцией академика Фортова В. Е., Темрокова А. И., Карамурзова Б. С., Ефремова В. П., Хищенко К. В., Султанова В. Г., Канеля Г. И., Левашова П. Р., Минцева В. Б., Савинцева А. П.

ОГЛАВЛЕНИЕ

СЕКЦИЯ 1. УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

<u>Шпатаковская Г.В.</u> Осцилляции полной энергии электронов в одномерной квантовой точке	15
<u>Силько Г.В., Смирнов Н.А.</u> Индий при высоком давлении	15
<u>Смирнов Н.А., Хищенко К.В.</u> Холодная кривая и уравнение состояния вольфрама при отрицательных давлениях	16
<u>Труханенок А.Н., Николаев Д.Н., Терновой В.Я.</u> Изучение околокритических состояний перехода жидкость–пар лития газотермическим методом	17
<u>Хищенко К.В., Жерноклетов М.В., Ковалев А.Е., Ломоносов И.В., Новиков М.Г., Фортвов В.Е.</u> Скорость звука в ударно-сжатом цери и уравнение состояния металла при высоких плотностях энергии	17
<u>Милявский В.В., Уткин А.В., Хищенко К.В., Фортвов В.Е., Жук А.З., Якушев В.В.</u> Ударное сжатие и уравнение состояния фуллерена C_{60} при высоких давлениях и температурах	18
<u>Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Куделькин В.Г., Мочалов М.А.</u> Полуэмпирическая модель уравнения состояния металлов РОСА-М. Уравнение состояния алюминия	18
<u>Молодец А.М., Авдонин В.В., Бабарэ Л.В., Гольшев А.А., Шахрай Д.В.</u> Реконструкция уравнения состояния и ударных адиабат твёрдого тела по его изотерме	19
<u>Шахрай Д.В., Молодец А.М.</u> Уравнения состояния и ударные адиабаты полиморфных модификаций рубидия	20
<u>Молодец А.М.</u> Термодинамические и переносные свойства полиморфных модификаций диоксида урана UO_2 при высоких давлениях и температурах	20
<u>Гольшев А.А., Молодец А.М.</u> Коэффициент теплопроводности тугоплавких оксидов (UO_2 , Al_2O_3 , BeO , MgO) при высоких температурах	21
<u>Голубев В.К.</u> Параметризация простого уравнения состояния с постоянным и переменным коэффициентом Грюнайзена для ряда металлов	22
<u>Хищенко К.В., Шемякин О.П.</u> Полуэмпирические широкодиапазонные уравнения состояния алюминия, меди и свинца на основе модели Томаса–Ферми	23
<u>Мартынец В.Г., Безвергий П.П., Матизен Э.В.</u> Непараметрическое масштабное уравнение состояния для описания критических свойств систем	23
<u>Воробьев В.С., Мальшиченко С.П.</u> О возможности сосуществования воды и льда при комнатной температуре в переменном внешнем электрическом поле	24
<u>Куперштох А.Л., Медведев Д.А.</u> Неустойчивость жидких диэлектриков в сильных электрических полях	25
<u>Карпенко С.В., Савиццев А.П., Темроков А.И.</u> Кластерный механизм фазовых переходов в ионных кристаллах в условиях высокого давления	26

<u>Мамчурев М.О., Карпенко С.В., Темроков А.И.</u> Определение давления металлизации массивных щелочно-галлоидных кристаллов	26
<u>Джасавадов Л.Н.</u> Определение термодинамических свойств методом импульсно-адиабатической модуляции давления	27
<u>Башарин А.Ю., Турчанинов М.А.</u> Структурные и морфологические особенности кристаллов графита, формирующихся при быстром затвердевании жидкого углерода	28
<u>Турчанинов М.А., Башарин А.Ю.</u> Анизотропия смачивания жидким углеродом различных граней кристалла графита	28
<u>Тарасов В.Д., Чеховской В.Я.</u> Фазовые переходы в диоксиде циркония	28
<u>Русин С.П., Пелецкий В.Э.</u> Эффективная излучательная способность неизотермической трубчатой полости при субсекундном резистивном нагреве	29
<u>Дегтярева В.Ф., Сахаров М.К., Новохатская Н.И., Дегтярева О.Н.</u> Сжимаемость и стабильность фаз латуней в системе Cu-Zn при давлении до 50 ГПа	30
<u>Тихомирова Г.В., Бабушкин А.Н.</u> Влияние сверхвысоких давлений на формирование различных проводящих состояний C ₆₀	30
<u>Трефилова А.Н., Бабушкин А.Н.</u> Исследования влияния размеров кристаллитов на электрические свойства диоксида циркония при высоких давлениях	31
<u>Шабашова О.А., Бабушкин А.Н., Хейфец О.Л.</u> Электрические свойства AgGeBS _{3x} Se _{3(1-x)} (B = As, Sb; x = 0.1–0.9) при низких температурах и высоких давлениях	32
<u>Хейфец О.Л., Шабашова О.А., Бабушкин А.Н., Мельникова Н.В., Нугаева Л.Л.</u> Рентгеноструктурная аттестация и электрические свойства (PbSe) _{1-x} (AgAsSe ₂) _x	33
<u>Кривошеина М.Н., Котышева И.Ю.</u> Моделирование процессов обработки давлением начально-анизотропных материалов	33
<u>Мищенко С.С., Ногаев М.А.</u> Перевод стали из аустенитного в критическое состояние термомеханическим воздействием	34
<u>Вильчевская Е.Н., Фрейдли А.Б.</u> Возникновение зародышей новой фазы при деформировании упругих тел	35
<u>Куропатенко В.Ф.</u> Продукты взрыва — многокомпонентная среда	36
<u>Сахаров М.Ю., Куропатенко В.Ф.</u> Уравнение состояния плотных ВВ	36
<u>Корец А.Я.</u> Особенности детонационного алмазосодержащего материала и ИК и КР спектры	37
<u>Черевко А.Г.</u> Технологический и фундаментальный критерии применимости классической теории нуклеации	38
<u>Стегайлов В.В.</u> Исследование кинетики поверхностного плавления методом молекулярной динамики	39
<u>Куксин А.Ю.</u> Исследование флуктуаций вблизи границ устойчивости кристалла методом молекулярной динамики	39
<u>Бажиров Т.Т.</u> Кавитация и область устойчивости жидкого свинца. Молекулярно-динамический расчет	40
<u>Иванов А.В.</u> Гибридное кинетическое моделирование динамики конденсированных сред	41
<u>Литовченко М.Н.</u> Моделирование рассеяния звуковых волн в среде со случайно-неоднородными физическими свойствами	41

<u>Долбин И.В.</u> О влиянии стерического фактора на скорость термоокислительной деструкции гетероцепных полиэфиров	42
<u>Вихренко В.С., Грода Я.Г., Гапанюк Д.В.</u> Уравнения состояния интеркаляционных систем и их использование при исследовании равновесных и транспортных характеристик	43
<u>Устюжанин Е.Е., Рыков В.А., Кудрявцева И.В., Реутов Б.Ф.</u> Уравнение состояния R218 для широкого интервала давлений и температур, включая критическую область	44
<u>Вербицкая О.В., Кузнецова О.В., Миронова Е.Е., Сапожников А.Т., Соколов В.П.</u> Интегрированная информационно-технологическая среда разработки уравнений состояний на примере оболочки комплекса ТУР	45
<u>Левашов П.Р., Мигисор М.А., Хищенко К.В.</u> Расчеты термодинамических свойств по многофазным уравнениям состояния металлов через Интернет	45
<u>Левашов П.Р., Можарова Т.С., Хищенко К.В.</u> К вопросу об использовании нерегулярных сеток для аппроксимации многофазных уравнений состояния	46

**СЕКЦИЯ 2. УДАРНЫЕ ВОЛНЫ. ДЕТОНАЦИЯ.
ГОРЕНИЕ**

<u>Канель Г.И.</u> Приближение к идеальной прочности: задачи, результаты измерений и расчетов	48
<u>Фрутиков А.И.</u> Ударное сжатие сплавов железа с кремнием. Возможное содержание кремния в ядре Земли	49
<u>Кополов А.В., Лихачев А.П., Фортон В.Е., Опарин А.М., Анисимов С.И., Хищенко К.В., Ломоносов И.В.</u> Акустическая неустойчивость ударных волн в магнии: теория и расчет	50
<u>Уткин А.В., Тортунов С.И., Ефремов В.П., Фортон В.Е.</u> Ударная сжимаемость смеси Zn + S при различной дисперсности цинка	50
<u>Савиных А.С., Матвеев А.В.</u> Плавление цинка в разгрузке при ударно-волновом нагружении	51
<u>Соколов С.Н., Милявский В.В., Бородин Т.И., Жук А.З., Жерноклетов Д.М.</u> Ударно-волновые исследования фуллера C ₇₀ с ГПУ-структурой в ампулах сохранения плоской геометрии	52
<u>Сазонова Л.В., Милявский В.В., Бородин Т.И., Соколов С.Н., Белятинская И.В., Жерноклетов Д.М., Моздыков В.А.</u> Особенности ударного метаморфизма плагиоклаза и амфибола в условиях ступенчатого ударно-волнового сжатия полиминеральных горных пород	53
<u>Бродова И.Г., Козлов Е.А., Ленишкова И.П., Литюнова О.В.</u> Структурные превращения в алюминиды переходных металлов при ударно-волновом нагружении	53
<u>Сосиков В.А., Уткин А.В.</u> Импульсное растяжение пентадекана и гексадекана при ударно-волновом воздействии	54
<u>Хейфец А.Э., Хомская И.В., Зельдович В.И.</u> Исследование прочности сплавов при всестороннем растяжении методом квазиоднородного ударно-волнового нагружения	55
<u>Гаркушин Г.В., Разоренов С.В.</u> Влияние температуры на механические свойства TiNi при ударно-волновом нагружении	56

<i>Янцлжин А.В.</i> Разрушение и структурные превращения кристаллического железа при ударно-волновом нагружении. Исследование методом молекулярной динамики	57
<i>Извеков О.Я., Коидауров В.И.</i> Теоретическое и экспериментальное исследование фрагментации хрупких тел	57
<i>Козлова М.А.</i> Моделирование упрочнения анизотропных материалов при динамическом нагружении	58
<i>Атрошенко С.А., Ермолаев В.А., Наумова Н.С.</i> Динамическая рекристаллизация в ударно-нагруженной меди	59
<i>Мещеряков Ю.И.</i> Об эволюционном и катастрофическом режимах энергообмена в динамически деформируемых средах	60
<i>Наймарк О.Б., Asay J.R.</i> Автомодельные закономерности структурной релаксации и формирования волновых фронтов в ударно-нагруженном Al	60
<i>Баяндин Ю.В., Наймарк О.Б., Asay J.R.</i> Численное моделирование и анализ автомодельной структуры ударных волн в Al	61
<i>Леонтьев В.А., Соковиков М.А., Наймарк Д.О., Пермяков С.Л.</i> О волновой природе пластической деформации в металлах	62
<i>Уваров С.В., Плехов О.А., Николаева Е.А.</i> Исследование откольного разрушения армко-железа	63
<i>Якушев В.В., Уткин А.В., Апаньин А.В., Тацкий В.Ф., Жуков А.Н., Дрёмин А.Н., Бочко А.В., Кузин Н.Н.</i> Откольная прочность образцов из нитрида бора	63
<i>Скрипняк Е.Г., Скрипняк В.А.</i> Моделирование высокоскоростной деформации наноструктурных материалов	64
<i>Скрипняк В.А., Скрипняк Е.Г., Разоренов С.В., Майер Л.В., Крюгер Л.Л.</i> Моделирование высокоскоростной деформации титановых сплавов при нормальной и повышенных температурах	65
<i>Скрипняк В.А., Каракулов В.В.</i> О распределении массовой скорости в плоских ударных волнах, распространяющихся в металлокерамических композитах	66
<i>Радченко А.В.</i> Проблемы моделирования ударно-волновых процессов и разрушения в анизотропных материалах	66
<i>Зеленугин С.А., Толкачев В.Ф., Зеленугин А.С., Шпаков С.С.</i> Широкодиапазонная модель разрушения керамики при высокоскоростном ударе	67
<i>Хорев И.Е., Горельский В.А., Ерохин Г.А., Рогова А.А.</i> Дивергентные кинстические механизмы сквозного пробивания преград в проблеме высокоскоростного соударения твердых тел	68
<i>Радченко П.А.</i> Численный анализ поведения анизотропных материалов на пределе пробития	69
<i>Апакидзе Ю.В., Тихонов А.А., Уткин А.В., Гафаров Б.Р.</i> Особенности поведения УУМ при ударно-волновом нагружении	69
<i>Чепрунов А.А., Острик А.В.</i> Экспериментальные исследования нестационарного деформирования и разрушения композитных оболочек	70
<i>Сергеичев И.В., Брагов А.М., Ломунов А.К.</i> Механические свойства некоторых горных пород при высокоскоростном деформировании	71

полухрупких материалов, к которым относятся серые чугуны, углеродистые стали при низких температурах, а также для сплавов, которые при разрушении имеют остаточные деформации, превышающие предельные упругие в 5–8 раз. Отражающие переход от упругой к пластической деформации пределы упругости и текучести являются пластическими свойствами материала. Поэтому в рамках данной модели в упругой и пластической областях деформирования механические свойства материала могут описываться различными видами симметрии среды. Связь полных напряжений и деформаций в упругой области описывается обобщенным законом Гука. Пластическая деформация анизотропной среды описывается в рамках теории течения. Для условия пластической несжимаемости анизотропного материала определение полей напряжений через поля деформаций возможно с помощью теории упругопластических процессов Ильюшина. Условие текучести записывается через девиаторы напряжений Ильюшина в форме Лебедева, Ковальчука. Критерий разрушения материала подбирается в зависимости от вида анизотропии разрушения материала (для ортотропной или трансотропной симметрии механических свойств материала). После выполнения критерия разрушения поведение материала моделируется: либо гидродинамической моделью, если разрушение происходит в условиях сжатия, либо материал считается полностью разрушенным, если критерий разрушения выполняется в условия растяжения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект №03-01-00006 и программы Президиума РАН, проект №18.9.

ПЕРЕВОД СТАЛИ ИЗ АУСТЕНИТНОГО В КРИТИЧЕСКОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИМ ВОЗДЕЙСТВИЕМ

*Миценко С.С.^{*1}, Ногаев М.А.²*

¹ КРСУ, ² ИЕЦ, Бишкек, Республика Кыргызстан

**sergej42@mail.ru*

Исследование проведено на стали типа TRIP. Основной особенностью этой стали является повышение прочности за счёт образования мартенситных кристаллов в напряжённых участках. Поскольку мартенситная фаза имеет больший удельный объём, то происходит снятие возникающих напряжений в аустените за счёт образования мартенсита, что предотвращает разрушение.

В нашем исследовании разработан комплекс термомеханических воздействий, благодаря которым, за счёт внесения в сталь дефектов, элементарная ячейка аустенита приблизилась к параметрам элементарной ячейки мартенсита, в результате чего аустенит перешёл в критическое состояние, которое характеризуется равенством параметров кристаллических решёток аустенита и мартенсита. Это состояние было застabilизировано дислокационной структурой, которое сохранялось и при комнатной температуре.

Последующая деформация при комнатной температуре на такую же степень деформации, как и материала, после обычного аустенизационного отжига приводила к значительному росту количества мартенсита (на 15–20%), что позволило повысить прочность материала на 20–30% при сохранении высокой пластичности, и вязкости при разрушении.

Получено уравнение, описывающее изменение параметра решётки аусте-

нита при переходе её в критическое состояние в зависимости от величины напряжения, возникающего в кристаллической решётке аустенита, в результате термомеханического воздействия, абсолютной температуры T и $\Delta\sigma$ — напряжения в момент фазового перехода:

$$\Delta a = a(\Lambda/T)^{3/2} \exp(-B\sigma^2/T)\sigma^2 \Delta\sigma,$$

где Λ , B — коэффициенты, зависящие от системы единиц измерения и хим-состава.

ВОЗНИКНОВЕНИЕ ЗАРОДЫШЕЙ НОВОЙ ФАЗЫ ПРИ ДЕФОРМИРОВАНИИ УПРУГИХ ТЕЛ

Вильчевская Е.Н. , Фрейдли А.Б.*

ИПМАШ РАН, Санкт-Петербург

**ven@itcwin.com*

Фазовые переходы мартенситного типа представляют собой сложный термомеханический процесс, сопровождающийся появлением собственной деформации превращения и изменением механических свойств материала. Предлагается модель гетерогенного деформирования на начальной стадии превращения по механизму множественного возникновения эллипсоидальных зародышей новой фазы. Концентрация новой фазы, а также форма и ориентация зародышей зависят от внешнего поля деформаций и определяются требованием минимизации свободной энергии. Взаимодействие зародышей учитывается в приближении эффективного поля. При этом материал, претерпевающий фазовые превращения, становится нелинейно-упругим, даже в модели линейно-упругих фаз. Строятся области существования описанных структур и макродиаграммы деформирования, демонстрирующие эффект деформационного размягчения на пути фазового превращения. Во второй части доклада разрабатывается общий алгоритм описания фазового превращения включения во внешнем поле. Такими включениями могут быть благоприятно ориентированные зерна поликристалла или структурно-чувствительные неоднородности технологического происхождения. Кроме того, пространственная локализация фазовых превращений может быть вызвана неоднородностью напряжений, порождаемых различного рода концентраторами. Рассматривается модельная задача о фазовом превращении цилиндрического включения, находящегося в матрице из линейно-упругого материала. Переход включения из одного фазового состояния в другое определяется соображениями энергетической предпочтительности и устойчивости двухфазных состояний. В зависимости от параметров материала, типа граничных условий и относительных размеров включения и тела (масштабный эффект) возможно квазистатическое превращение включения чрез последовательность равновесных двухфазных состояний или спонтанный переход из одного фазового состояния в другое. Рассмотрена задача о взаимном влиянии трещины и включения, претерпевающего фазовое превращение. Показано, что напряжения, порождаемые трещиной, могут приводить к фазовым превращениям во включении, что в свою очередь может привести к изменению характера дальнейшего распространения трещины.

ПРОДУКТЫ ВЗРЫВА — МНОГОКОМПОНЕНТНАЯ СРЕДА

Куропатенко В.Ф.

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск

v.f.kuropatenko@vniitf.ru

Продукты взрыва за фронтом детонационной волны являются неравновесной смесью N компонентов ($N \approx 10-15$). В процессе установления равновесия компоненты взаимодействуют друг с другом и обмениваются импульсом, энергией, а при наличии химических реакций и массой. Как правило, в известных моделях многокомпонентных сред обменные процессы рассматриваются только в рамках парных взаимодействий компонентов, учитывающих их индивидуальные свойства (размер частиц, чистоту поверхности, адгезионные свойства и т.д.). Дополнительно к широко применяемым выражениям для интенсивности обмена импульсом и энергией между компонентами вводится тензор внешних для i -го компонента напряжений и потоки энергии. Для выбора конкретного выражения зависимости сил и потоков энергии от скоростей компонентов предлагается новый вид воздействия смеси на каждый компонент — кластерное взаимодействие. Исследуются условия, при которых средние величины P , ρ , E , \bar{U} удовлетворяют системе законов сохранения сплошной среды и устанавливается связь этих законов сохранения с законами сохранения компонентов. Для ликвидации произвола в выборе сил и потоков энергии предполагается, что они должны быть инвариантными относительно преобразования Галилея. Показано, что система законов сохранения смеси получается путем суммирования законов сохранения компонентов. Вводится понятие неравновесной кинетической энергии компонента и предлагается дополнительное уравнение для объемной концентрации, которое замыкает систему законов сохранения и уравнения состояния i -го компонента и не накладывает дополнительного ограничения на свойства смеси.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект №04-01-00050.

УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ПЛОТНЫХ ВВ

Сахаров М.Ю. , Куропатенко В.Ф.*

РФЯЦ-ВНИИТФ, Снежинск

**m.yu.sakharov@vniitf.ru*

Предлагается уравнение состояния (УРС) плотных взрывчатых веществ (ВВ), в основе которого лежит достаточно точная функциональная аппроксимация зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры и плотности. В соответствии с классическим подходом, энергия и давление представляются в виде суммы потенциальных и тепловых членов. Тепловое давление и энергия ядер и электронов описываются отдельно друг от друга. Энергия и давление нулевых колебаний являются асимптотиками тепловых членов при нулевой температуре. Удельная тепловая энергия ядер получается интегрированием по температуре функции теплоемкости. Из уравнения термодинамической совместности получается функциональная зависимость теплового давления ядер от удельного объема и температуры. Для определения произвольных функций от удельного объема используется условие, что энтропия ядер является полным дифференциалом. При построении тепловых электронных составляющих давления и энергии предполагается, что

это функции с разделяющимися переменными. Для построения потенциальной части берется потенциал типа Леннарда–Джонса, на параметры которого накладываются ограничения в точке с нулевой температурой и давлением и асимптотические ограничения при стремлении плотности к нулю и бесконечности. Сконструированное уравнение состояния имеет несколько подгоночных параметров — коэффициентов УРС. Численные значения коэффициентов УРС для каждого ВВ подбираются таким образом, чтобы расчетные значения наилучшим образом аппроксимировали известные экспериментальные значения. Основными опорными были выбраны данные по ударному сжатию ВВ. Подобранные значения коэффициентов проверяются на других процессах (изобарическое температурное расширение, теплоемкость при постоянном давлении, изобарическая температурная зависимость скорости звука и др.), для которых есть достоверные экспериментальные данные.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект №04-01-00050.

ОСОБЕННОСТИ ДЕТОНАЦИОННОГО АЛМАЗОСОДЕРЖАЩЕГО МАТЕРИАЛА И ИК И КРС СПЕКТРЫ

Корец А.Я.

КрГТУ, Красноярск

prcom@kgtu.runnet.ru

Были получены инфракрасные спектры (ИК) поглощения и спектры комбинационного рассеяния света (КРС) различных образцов ультрадисперсного алмазосодержащего материала (УДА). Анализ устойчивости ИК-спектров УДА, подвергнутых различным воздействиям (радиационному облучению, термическому воздействию и окислению), и анализ результатов, полученных ранее другими авторами (например, Губаревич Т.М.), позволил сделать вывод, что структурной единицей УДА является неоднородная компактная частица размерами 30–50 нм [1]. Очевидным фактом является связь этой структурно-неоднородной частицы с неравновесными детонационными процессами, которые проявляют себя через пульсации физико-химических параметров и, прежде всего, энергии, делают неопределенными сложившиеся представления о функциях состояния, и ограничивают, вообще говоря, рост любых кристаллов. Анализ спектров КРС (Раман-спектров) позволил связать широкую полосу $1600\text{--}1610\text{ см}^{-1}$ с молекулярными группами $X\text{--NO}_2$ ($X = \text{O}, \text{N}$); R--X--N=O ($X = \text{O}, \text{C}, \text{N}$), а не с sp^2 -углеродными включениями. Участие данных фрагментов в детонационных процессах потребовало уточнения роли азота в детонационных процессах [2]. На основе анализа экспериментальных ИК и КРС спектров было предложено разделить данные процессы на две составляющие: 1 — эндотермический переход от молекулярного азота (частичное разрушение данной молекулы) к азотному дефекту А типа; 2 — экзотермический процесс перехода от активированных азотсодержащих фрагментов исходных молекул взрывчатых веществ (ВВ) к молекулярному азоту.

1. Mironov E., Koretz A., Petrov E. // Proc. 12th Europ. Conf. «Diamond, Diamond-like materials», Hungary. Diamond and Related Materials. 2002. V.11. №3–6. P.872–876.

2. Mironov E., Petrov E., Koretz A. // Proc. Int. Workshop «Carbon-2004», USA, 2004. P.C074.

ТЕХНОЛОГИЧЕСКИЙ И ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЙ КРИТЕРИИ ПРИМЕНИМОСТИ КЛАССИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ НУКЛЕАЦИИ

Черевко А.Г.

СибГУТИ, Новосибирск

cherevko@mail.ru

Учтено влияние температурные флуктуаций на процесс нуклеации. Получены оценки размеров (g^*) критических зародышей, выше которых эти флуктуации не будут сказываться (g^{**}), а также оценки температурных отклонений ΔT^{**} от температуры перехода T_0 и пересыщений $\ln s^{**}$, ниже которых влияние температурных флуктуаций на технологический процесс можно не учитывать. Получено значение критического кластера (g^{**}), при котором температурные флуктуации равны температурному отклонению от температур перехода. Этот размер назван суперкритическим. Учет этих параметров позволяет ввести приведенные координаты $\Delta T/\Delta T^{**}$, $\ln s/\ln s^{**}$, g^*/g^{**} , в которых зависимость размера критического кластера от температуры и пересыщения выглядит особенно просто:

$$g^*/g^{**} = (\Delta T/\Delta T^{**})^{-3} = (\ln s/\ln s^{**})^{-3}.$$

Получены критерии применимости классической теории нуклеации, согласно которым температурные флуктуации можно не учитывать, если:

$$g^* > g^{**} = \left(\frac{3\lambda^*}{2\alpha^*}\right)^6 \cdot \left(\frac{k}{c_v^*}\right)^3 = \left(\frac{3\lambda_0^\nabla}{2\alpha^\nabla}\right)^6 \cdot \left(\frac{1}{c_v^\nabla}\right)^3,$$

$$\Delta T_0^\nabla < \Delta T_0^{\nabla**} \approx (2/3)^3 \cdot \left(\alpha_0^{\nabla 3} \cdot c_v^\nabla / \lambda_0^{\nabla 3}\right),$$

$$\ln s < \ln s^{**} \approx (2/3)^3 \cdot \left(\alpha_0^{\nabla 3} \cdot c_v^\nabla / \lambda_0^{\nabla 2}\right),$$

где $\lambda_0^\nabla = \lambda^*/(kT_0)$, $\alpha_0^\nabla = \alpha^*/(kT_0)$, $c_v^\nabla = c_v^*/k$ — приведенные теплота перехода, поверхностная энергия и изохорная теплоемкость, отнесенные к одной молекуле. Первый критерий имеет теоретическое значение. Второго и третьего можно назвать технологическими, они дают оценку параметров технологического процесса — температурного отклонения и пересыщения, при которых температурные флуктуации не будут играть роли. Влияние температурных флуктуаций на процесс нуклеации рассматривался рядом авторов, например [1, 2].

1. Куни Ф.М., Гринин А.П. // Коллоидный журнал. 1990. Т.52. №1. С.54–61.
2. McGraw R. // J. Chem. Phys. 1995. V.102. №22. P.8983–8994.